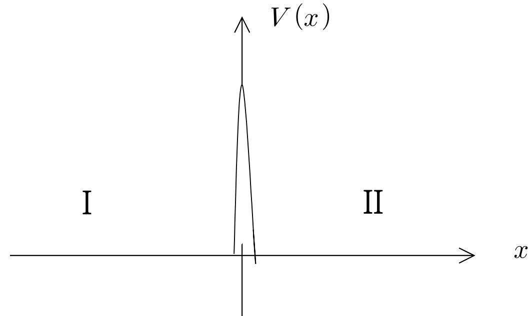
5.3 델타함수 위치에너지 (Delta-Function Potential)

이 절에서는 위치에너지가 델타(δ)-함수 형태로 주어졌을 때의 경우를 생각하여 보도록 하겠다. 델타함수 형태의 경우 위치에너지가 앞 절에서처럼 유한한 연속적인 값으로 주어지지 않고 특정 위치에서 무한한 값을 가지게 되므로 슈뢰딩거 방정식을 풀 때 그 경계조건을 구할 때 주의하여야 한다. 여기서 델타함수 위치에너지가 0보다 커서 장벽으로 작용하는 경우와 0보다 작아서 우물처럼 작용하는 두 가지 경우를 생각할 수 있는데, 입자의 위치에너지 E가 0보다 큰 경우는 두 경우 다 산란(scattering)으로 취급할 수 있으며, E가 0보다 작은 경우에는 위치에너지도 0보다 작은 우물의 경우에 속박상태(bound state)를 생각할 수 있다. 이제 이러한 산란과 속박상태의 경우를 차례로 생각하여 보도록 하자.

• 델타함수 위치에너지에 의한 산란

먼저 위치에너지가 장벽(barrier)의 형태로 주어졌을 때 산란을 생각해보자. 이 경우 슈뢰딩거 방정식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\lambda\delta(x)\psi=E\psi\,,\qquad \lambda>0\ .$$



[그림5.5] 델타함수 위치에너지

여기서 우리는 무한대의 위치에너지를 갖는 $x=0$과 위치에너지가 0인 $x=0$을 제외한 영역 I과 II를 생각하겠다([그림5.5]참조). 그러면, 영역 I과 영역 II에서는 위치에너지가 영이므로 파동함수는 자유입자의 슈뢰딩거 방정식을 만족한다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi$$

그러므로 $k^2\equiv\frac{2mE}{\hbar^2}$ 로 놓으면, 파동함수는 $\psi\sim\ e^{\pm ikx}$ 형태의 해를 갖는다.

이제 입자가 $-x$ 방향에서 $+x$ 방향으로 입사하였다면, 입사파와 반사파가 함께 존재하는 $x<0$ 인 영역 I 에서의 일반해는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi_I=A\,e^{ikx}+B\,e^{-ikx}$$

그리고 투과파만 존재하는 $x>0$ 인 영역 II 에서는 파동함수가 다음과 같이 주어진다.

$$\psi_{II}=Ce^{ikx}$$

한편 $x=0$에서는 존재확률이 하나의 값으로 주어져야 하므로 두 파동함수가 일치하여야 한다. 즉, 앞 절에서와 같이 $\psi_I(x=0)=\psi_{II}(x=0)$ 의 경계조건을 만족하여야 한다.

그렇다면 두 파동함수가 부드럽게 연결되는 조건인 $\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0}=\left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0}$ 의 경계조건도 유효할까? 이를 살펴보기 위하여 슈뢰딩거 방정식의 양변에 다음의 적분을 생각하여 보자.

$$\lim_{\epsilon\to0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}dx\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\lambda\delta(x)\psi=E\psi\right)$$

위 적분식을 다시 항별로 살펴보면, 다음과 같이 된다.

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d\psi}{dx}\bigg|_{\epsilon}-\frac{d\psi}{dx}\bigg|_{-\epsilon}\right)\right\}+\lim_{\epsilon\to 0}\lambda\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\delta(x)\psi(x)dx=\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}E\psi\,dx$$

여기서 우변은 E 와 ψ 가 각각 유한한 값을 가지므로 0 이 되고, 좌변의 두 번째 항은 델타함수의 특성에 의하여 $x=0$ 에서의 파동함수 값을 갖는다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\epsilon\to 0}\left(\frac{d\psi}{dx}\Big|_{\epsilon}-\frac{d\psi}{dx}\Big|_{-\epsilon}\right)+\lambda\psi(0)=0\ .$$

즉, 앞 절의 경우와는 달리 우리는 파동함수의 미분값이 경계에서 같지 않고 그 차이가 다음 식에 의하여 주어지는 경계조건을 얻는다.

$$\frac{d\psi_{II}}{dx}\bigg|_{x=0}-\frac{d\psi_{I}}{dx}\bigg|_{x=0}=\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0)\ .$$

참고로 모든 영역에서 유한한 값을 갖는 일반적인 위치에너지의 경우 좌변의 두 번째 항은 다음과 같이 쓸 수 있으므로

$$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}V(x)\psi(x)dx$$

그 값이 0 이 됨을 알 수 있다. 그러므로 일반적인 유한한 위치에너지의 경우는 두 파동함수의 미분값이 경계에서 일치하는 앞 절에서 사용한 경계조건이 얻어짐을 알 수 있다.
이제 위에서 얻은 경계조건을 적용하여 파동함수의 계수를 구하여 보자.
먼저 $\psi_I(0)=\psi_{II}(0)$으로부터 우리는 다음의 조건식을 얻는다.

$$A+B=C\ .$$

다음으로 $\frac{d\psi_{II}}{dx}\Big|_{x=0}-\frac{d\psi_{I}}{dx}\Big|_{x=0}=\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0)$ 으로부터는 다음의 조건식을 얻는다.

$$ikC-ikA+ikB=\frac{2m\lambda}{\hbar^2}C\ .$$

여기서 $\psi_I(0)=\psi_{II}(0)$ 이므로 우리는 $\psi(0)$의 값으로 둘 중 어느 것을 사용하여도 좋다.
이제 이 두 식을 연립하여 풀면,

$$-ikA+ikB=\left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}-ik\right)(A+B)\ \text{로부터}\ \left[2ik-\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right]B=\frac{2m\lambda}{\hbar^2}A$$

즉, $B=\dfrac{1}{\dfrac{ik\hbar^2}{m\lambda}-1}A$, $C=\dfrac{1}{1+\dfrac{im\lambda}{k\hbar^2}}A$ 를 얻는다.

이로부터 우리는 각각 다음의 반사계수와 통과계수를 얻는다.

$$R=\left|\frac{J_{\text{반사}}}{J_{\text{입사}}}\right|=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\frac{1}{1+\dfrac{k^2\hbar^4}{m^2\lambda^2}}\ ,\qquad T=\left|\frac{J_{\text{투과}}}{J_{\text{입사}}}\right|=\left|\frac{C^2}{A^2}\right|=\frac{1}{1+\dfrac{m^2\lambda^2}{k^2\hbar^4}}\ .$$

여기서 우리는 $T+R=1$ 이 됨을 쉽게 확인할 수 있다.

• **델타함수 위치에너지에서의 속박상태**

델타함수 위치에너지가 우물처럼 존재할 때, 입자의 에너지가 음인($E<0$) 경우 우리는 속박상태를 생각할 수 있다. 이제 이러한 델타함수 우물의 경우에 속박상태가 실제로 존재하는지 살펴보기로 하겠다. 이러한 우물의 경우 슈뢰딩거 방정식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}-\lambda\delta(x)\psi=E\psi\,,\qquad \lambda>0$$

앞에서와 동일하게 $x=0$를 기준으로 $x<0$ 인 영역 I과 $x>0$ 인 영역 II로 나누어 생각하여 보자. 그러면, 두 영역 I, II 에서 위치에너지는 0이므로 앞과 동일하게 슈뢰딩거 방정식을 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$

여기서 다른 점은 에너지가 음의 값을 가지므로 우리는 다음과 같이 $\kappa^2\equiv-\frac{2mE}{\hbar^2}>0$ 을 정의한다. 그러면 슈뢰딩거 방정식은 다음과 같이 되고,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\kappa^2\psi=0\ ,$$

그 해는 $\psi\sim e^{\pm\kappa x}$ 의 형태를 갖는다. 하지만, $x=\pm\infty$ 에서 파동함수의 값이 발산하지 않아야 하므로 우리는 각각의 영역 I 과 II 에서 다음의 파동함수를 생각할 수 있다.

$$\psi_I=Ae^{kx}\ ,\qquad x<0$$

$$\psi_{II}=Be^{-kx}\ ,\qquad x>0\ .$$

한편 경계조건은 델타함수 장벽의 경우에서와 동일한 방법으로 구할 수 있는데, 다만 λ가 $-\lambda$로 바뀐 점이 다르다. 즉,

$$\psi_I(0)=\psi_{II}(0)\ ,$$

$$\left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0}-\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0}=-\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0)\ .$$

그러므로, 계수들에 대하여 다음의 관계식을 얻는다.

$$A=B\ ,$$

$$-\kappa B-\kappa A=-\frac{2m\lambda}{\hbar^2}A\ .$$

이로부터 우리는 $\kappa=\frac{m\lambda}{\hbar^2}$ 임을 얻는다. 그런데 앞에서 $\kappa^2\equiv-\frac{2mE}{\hbar^2}$ 로 주어졌으므로 우리는 속박상태의 에너지가 다음과 같이 주어짐을 알 수 있다.

$$E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}=-\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}<0\ .$$

즉, 델타함수 우물의 경우 속박상태가 단 하나만 존재한다.

한편 파동함수의 규격화 조건으로부터 우리는 계수 A 의 값을 구할 수 있다.

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx=\int_{-\infty}^{0}|A|^2e^{2kx}\,dx+\int_0^{\infty}|B|^2e^{-2kx}\,dx=1$$

즉, 두 계수가 다음의 관계를 만족하므로,

$$\frac{|A|^2}{2\kappa}+\frac{|B|^2}{2\kappa}=1 \ ,$$

$A=B$ 의 관계로부터 $A=B=\sqrt{\kappa}$ 임을 얻는다.
그러므로 우리는 델타함수 우물에서의 속박상태 파동함수를 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi(x)=\sqrt{\kappa}\ e^{-k|x|} \ .$$
